常微分方程式における非線形境界値問題の数値解法 (数値計算のアルゴリズムの研究)

小鹿, 丈夫

数理解析研究所講究録
382巻 1980年 181-193

常微分方程式における非線形境界値問題の数値解法

大阪教育大学　小鹿丈夫

1. はじめに

n_ℓ 次元微分方程式

$$\dot{x}^{(\ell)}=f^{(\ell)}(x^{(\ell)},t),\quad t_\ell<t<t_{\ell+1},\ \ \ell=1,2,\cdots,m \tag{1.1}$$

において，n 次元境界条件が

$$g(x^{(1)}(t_1^+),x^{(1)}(t_2^-),x^{(2)}(t_2^+),\cdots,x^{(m)}(t_m^+),x^{(m)}(t_{m+1}^-))=0 \tag{1.2}$$

で与えられているような非線形境界値問題を考える．ここに，

$$n=\sum_{\ell=1}^{m}n_\ell,\quad m\geq 1 \tag{1.3}$$

とする．また $t_\ell^{\pm}=t_\ell\pm 0$ で，t_ℓ はここでは固定されているものとする．関数 $f^{(\ell)}$ は (x^ℓ,t) 平面のある領域 D_ℓ において，t に関して連続でかつ $f^{(\ell)}\in C^2(D_\ell)$ とする．また，g は R^{2n} 次元空間のある領域 Ω で $g\in C^2(\Omega)$ とする．ここに，

$$\begin{aligned}&\Omega=\Omega_1^+\times\Omega_2^-\times\Omega_2^+\times,\cdots,\times\Omega_m^+\times\Omega_{m+1}^-,\\&\Omega_\ell^+=\{x^{(\ell)}\mid(x^{(\ell)},t_\ell^+)\in D_\ell\},\\&\Omega_{\ell+1}^-=\{x^{(\ell)}\mid(x^{(\ell)},t_{\ell+1}^-)\in D_\ell\},\quad \ell=1,2,\cdots,m\end{aligned} \tag{1.4}$$

である．

微分方程式(1.1)式には，各部分区間(t_l, t_{l+1})ごとに方程式の形式或いは次元数が異なるような場合も含まれているものとする．また，境界条件(1.2)式には初期値条件，多点境界条件，周期境界条件，連続境界条件，或いは不連続境界条件が含まれているものとする．

以下では，quasilinearization method [1]，及び初期値修正法(initial value adjusting method) [2−8] による数値解法について考察する．

2. Quasilinearization method　ここでは，Bellman等の提案している quasilinearization method [1] を拡張した解法について考える．いま，第k回目の繰返し計算過程において，第l部分区間(t_l, t_{l+1})の初期値${}^k x(t_l^+)$が与えられているものとし，対応する部分初期値問題

$$\dot{x}^{(l)} = f^{(l)}(x^{(l)}, t), \qquad x^{(l)}(t_l^+) = {}^k x(t_l^+) \tag{2.1}$$

の解を$x^{(l)}(t) = {}^k x^{(l)}(t)$とする．この時境界条件(1.2)式を

$${}^k g = g({}^k x^{(1)}(t_1^+), {}^k x^{(1)}(t_2^-), \cdots, {}^k x^{(m)}(t_m^+), {}^k x^{(m)}(t_{m+1}^-)) \tag{2.2}$$

と表わすことにする．ここで，n_l次元ベクトルを次のように定義する．

$${}^k z^{(l)}(t) = {}^{k+1}x^{(l)}(t) - {}^k x^{(l)}(t). \tag{2.3}$$

(2.3)式を(2.1)式に代入し，その結果をTaylor級数に展開して高次の項を無視すれば

$$ {}^k\dot{z}^{(\ell)}(t) = f_x^{(\ell)}({}^k x^{(\ell)}, t)\, {}^k z^{(\ell)}(t), \qquad {}^k z^{(\ell)}(t_\ell^+) = {}^{k+1}x(t_\ell^+) - {}^k x(t_\ell^+) \tag{2.4} $$

を得る．更に $n_\ell \times n_\ell$ 次元の基本解行列 ${}^k\Phi(t, t_\ell^+)$ を

$$ {}^k\dot{\Phi}(t, t_\ell^+) = f_x^{(\ell)}({}^k x^{(\ell)}, t)\, {}^k\Phi(t, t_\ell^+), \qquad {}^k\Phi(t_\ell^+, t_\ell^+) = I_\ell \tag{2.5} $$

で定義する．ここに I_ℓ は $n_\ell \times n_\ell$ 次元の単位行列である．(2.4)式から

$$ {}^{k+1}x^{(\ell)}(t) = {}^k x^{(\ell)}(t) + {}^k\Phi(t, t_\ell^+)\left[{}^{k+1}x(t_\ell^+) - {}^k x(t_\ell^+)\right] \tag{2.6} $$

を得る．同様に，(2.6)式の関係を (2.2) 式へ代入し，その結果を Taylor 級数に展開して高次の項を無視すれば次式を得る．

$$ {}^k g + \sum_{\ell=1}^{m}\left[\frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_\ell^+)} + \frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_{\ell+1}^-)}\, {}^k\Phi(t_{\ell+1}^-, t_\ell^+)\right]\cdot\left[{}^{k+1}x(t_\ell^+) - {}^k x(t_\ell^+)\right] = 0 . \tag{2.7} $$

ここで，$n \times n$ 次元行列 ${}^k S$ 及び $n \times n_\ell$ 次元行列 ${}^k S^{(\ell)}$ を

$$ \begin{aligned} {}^k S &= \left[{}^k S^{(1)}, {}^k S^{(2)}, \cdots, {}^k S^{(m)}\right], \\ {}^k S^{(\ell)} &= \frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_\ell^+)} + \frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_{\ell+1}^-)}\, {}^k\Phi(t_{\ell+1}^-, t_\ell^+), \quad \ell = 1, 2, \cdots, m \end{aligned} \tag{2.8} $$

のように定義すれば，(2.7)式は

$$ {}^k S\left[{}^{k+1}X - {}^k X\right] = -{}^k g, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{2.9} $$

と表わせる．ここに n 次元ベクトル ${}^k X$ は

$$ {}^k X = \left({}^k x(t_1^+)', {}^k x(t_2^+)', \cdots, {}^k x(t_m^+)'\right)' \tag{2.10} $$

である．ここで，(2.9)式のアルゴリズムを一般化した quasi-linearization method，行列 S を修正行列と呼ぶことにする．

以上の議論から明らかなように，この修正行列 ${}^k S$ が正則ならば n 元の線形代数方程式 (2.9)式を解くことにより，各部分区間の新たな初期値 ${}^{k+1}x(t_\ell^+)$ $(\ell = 1, 2, \cdots, m)$ は求められる．なお，この場合の収束条件については文献 5, 8, 9 の定理を拡張す

ることにより容易に得られる.

3. 初期値修正法　2. で述べたように, *quasilinearization method* においては偏導関数 f_x 及び $\partial g/\partial x(t_l)$ を予め解析的に求めておく必要があり, 更に (2.8) 式から修正行列 S を計算する必要がある. このため, 多くの記憶容量を必要とし多次元の問題には適用し難い.

そこで, これらの解析的準備を全くすることなく, 与えられた微分方程式と境界条件を与えるだけで解くための一つの方法, 初期値修正法によるアルゴリズムについて考える[2-8].

いま, 第 k 回目の繰返し計算過程において, 第 l 部分区間の初期値 ${}^k x(t_l^+)$ が与えられているものとする. この時, 次式で与えられる n_l 次元の摂動初期値問題

$$ {}^k_j\dot{y}^{(l)} = f^{(l)}({}^k_j y^{(l)}, t), \quad {}^k_j y^{(l)}(t_l^+) = {}^k x^{(l)}(t_l^+) + \varepsilon e_j^{(l)}, \quad \begin{matrix} j=1,2,\cdots,n_l, \\ l=1,2,\cdots,m \end{matrix} \qquad (3.1) $$

を解くことにより得られる終端値を ${}^k_j y^{(l)}(t_{l+1}^-)$ とする. ここに ε は摂動パラメータ $(0<\varepsilon \ll 1)$, $e_j^{(l)}$ は n_l 次元の単位ベクトルである. この時の境界条件 (2.2) 式を

$$ {}^k_j g^{(l)}(\varepsilon) = g({}^k x^{(1)}(t_1^+), \cdots, {}^k_j y^{(l)}(t_l^+), {}^k_j y^{(l)}(t_{l+1}^-), \cdots, {}^k x^{(m)}(t_{m+1}^-)) \qquad (3.2) $$

とする. ここで, ${}^k\psi_j(t, t_l^+; \varepsilon)$ を第 j 列ベクトルとする $n_l \times n_l$ 次元行列 ${}^k\Psi(t, t_l^+; \varepsilon)$ を

$$ {}^k\psi_j(t, t_l^+; \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon}\left[{}^k_j y^{(l)}(t) - {}^k x^{(l)}(t) \right] \qquad (3.3) $$

のように定義する. また (2.2) 及び (3.2) 式から, n 次元ベク

トル ${}^k s_j^{(\ell)}(\varepsilon)$ を第 j 列ベクトルとする $n\times n_\ell$ 次元行列 ${}^kS^{(\ell)}(\varepsilon)$, 及び $n\times n$ 次元行列 ${}^kS(\varepsilon)$ を

$$ {}^k s_j(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon}\left[{}^k_j g^{(\ell)}(\varepsilon) - {}^k g\right], \quad j=1,2,\cdots,n_\ell\,;\ \ell=1,2,\cdots,m, \tag{3.4a} $$

$$ {}^kS(\varepsilon) = \left[{}^kS^{(1)}(\varepsilon),\ {}^kS^{(2)}(\varepsilon),\ \cdots,\ {}^kS^{(m)}(\varepsilon)\right], \quad k=0,1,2,\cdots \tag{3.4b} $$

のように定義する．この時 (2.9) 式に対応して，各部分区間の新たな初期値を

$$ {}^kS(\varepsilon)\ \left[{}^{k+1}X - {}^kX\right] = -{}^kg, \quad k=0,1,2,\cdots \tag{3.5} $$

より定めるアルゴリズムを考える．この (3.5) 式のアルゴリズムを区間分割を伴う初期値修正法 (*initial value adjusting method with interval decomposition*)，また行列 $S(\varepsilon)$ を区間分割を伴う初期値修正法における修正行列と呼ぶことにする．

この時，初期値修正法と一般化した *quasilinearization method* との間には，次の定理の関係が成り立つ．

<u>定理 3.1</u>

(i) $$ \lim_{\varepsilon\to 0} {}^k\Phi(t_{\ell+1}^-, t_\ell^+;\varepsilon) = {}^k\Phi(t_{\ell+1}^-, t_\ell^+), \quad \ell=1,2,\cdots,m, \tag{3.6} $$

(ii) $$ \lim_{\varepsilon\to 0} {}^kS(\varepsilon) = {}^kS, \quad k=0,1,2,\cdots. \tag{3.7} $$

[証明]　(3.1) 式の解は (3.3) 式から

$$ {}^k_j y^{(\ell)}(t) = {}^kx^{(\ell)}(t) + \varepsilon\, {}^k\psi_j(t, t_\ell^+;\varepsilon) \tag{3.8} $$

と表わせる．(3.8) 式を (3.1) 式へ代入し，その結果を Taylor 級数に展開することにより

$$ {}^k\dot\psi_j(t, t_\ell^+;\varepsilon) = f_x^{(\ell)}({}^kx^{(\ell)}, t)\,{}^k\psi_j(t, t_\ell^+;\varepsilon) + \frac{1}{\varepsilon}O(\varepsilon^2), \quad {}^k\psi_j(t_\ell^+, t_\ell^+;\varepsilon) = e_j^{(\ell)} $$

$$t_\ell < t < t_{\ell+1}, \quad j=1,2,\cdots,n_\ell\,;\ \ell=1,2,\cdots,m \tag{3.9}$$

を得る．ここに $O(\varepsilon^2)$ は ε の高次の項で，$O(\varepsilon^2)/\varepsilon$ は $\varepsilon\to 0$ のとき 0 に収束する項である．従って，(3.9)式の解は $\varepsilon\to 0$ の極限においては quasilinearization method における基本解行列 (2.5) 式の第 j 列ベクトル ${}^k\psi_j(t_{\ell+1}^-, t_\ell^+)$ となり，(i)の関係が証明された．

同様に，(3.8)式の関係を用いて (3.2) 式を Taylor 級数に展開すれば，

$${}^k_j g^{(\ell)}(\varepsilon) = {}^k g + \varepsilon\left[\frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_\ell^+)} e_j^{(\ell)} + \frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_{\ell+1}^-)}\, {}^k\psi_j(t_{\ell+1}^-, t_\ell^+;\varepsilon)\right] + O(\varepsilon^2) \tag{3.10}$$

を得る．ここに $O(\varepsilon^2)$ は ε の高次の項で，$O(\varepsilon^2)/\varepsilon$ は $\varepsilon\to 0$ のとき 0 に収束する項である．従って，(3.10) 式及び (i) より，

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left[{}^k_j g^{(\ell)}(\varepsilon) - {}^k g\right] = \frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_\ell^+)} e_j^{(\ell)} + \frac{\partial\, {}^k g}{\partial x^{(\ell)}(t_{\ell+1}^-)}\, {}^k\psi_j(t_{\ell+1}^-, t_\ell^+) \tag{3.11}$$

が成り立つ．以上から明らかなように，(3.11) 式は $\varepsilon\to 0$ のとき (2.8)式で定義される $n\times n_\ell$ 次元行列 ${}^k S^{(\ell)}$ の第 j 列ベクトルとなり，(ii)の関係が証明された．　[証明終]

これまでの議論においては，摂動パラメータ ε は繰返し計算に関係なく一定であると仮定してきたが，ε 及び収束速度に関して次の定理が成り立つ．

<u>定理 3.2</u>　一般化した quasilinearization method における修正行列 ${}^k S$ が正則ならば，区間分割を伴う初期値修正法における修正行列 ${}^k S(\varepsilon)$ の逆行列が存在するような摂動パラメー

タ $\varepsilon = {}^k\varepsilon$ $(k=1,2,\cdots)$ が存在し，適当な条件のもとでは (3.5) 式のアルゴリズムは近似的に2次の収束速度で解に収束する.

［証明］　文献 5, 8, 9 における定理を拡張することにより，容易に証明される.

<u>4. 区間分割を伴う初期値修正法のアルゴリズム</u>　3. の議論から，(1.1) 及び (1.2) 式で与えられる非線形境界値問題を解くための区間分割を伴う初期値修正法のアルゴリズムは次のようになる.

Step 0.　$k=0$ とおき，各部分区間の初期値に対する推定値 ${}^0x(t_\ell^+)$ $(\ell=1,2,\cdots,m)$，一定なる摂動パラメータ ε 及び収束判定値 $\wedge(>0)$ を与える.

Step 1.　部分初期値問題 (2.1) 式を解き，対応する各部分区間の終端値 ${}^kx^{(\ell)}(t_{\ell+1}^-)$ $(\ell=1,2,\cdots,m)$ を計算する.

Step 2.　次式で与えられる収束判定条件

$$ {}^kG = \sqrt{\frac{1}{n}\,{}^kg'\,{}^kg} \tag{4.1} $$

を計算する．もし ${}^kG \leq \wedge$ ならば計算を終了する．さもなければ次のステップへ進む.

Step 3.　摂動初期値問題 (3.1) 式を解くことにより，対応する部分区間の終端値 ${}^k_jy^{(\ell)}(t_{\ell+1}^-)$ $(j=1,2,\cdots,n_\ell;\ \ell=1,2,\cdots,m)$ を求め，(3.2) 式を計算

する．次に (3.4) 式より修正行列 ${}^{k}S(\varepsilon)$ を求める．

Step 4. n 元連立線形代数方程式 (3.5) 式を解き，各部分区間の新たな初期値 ${}^{k+1}x(t_\ell^+)$ $(\ell=1,2,\cdots,m)$ を定める．$k=k+1$ と置き，Step 1 に戻る．

5. Five compartment model

非線形常微分方程式

$$
\begin{aligned}
\dot{x}_1 &= \frac{-50x_1}{500+x_1} - 0.24x_1 + 0.1x_2 + 2x_5 + r, \\
\dot{x}_2 &= 0.2x_1 - 0.1x_2, \\
\dot{x}_3 &= \frac{50x_1}{500+x_1} - 2.9x_3 + 0.4x_4, \\
\dot{x}_4 &= -0.9x_3 - 0.4x_4, \\
\dot{x}_5 &= -2x_5, \qquad\qquad 0 < t < 20
\end{aligned}
\tag{5.1}
$$

で与えられる five compartment model を考える [10]．ここに，x_i は身体の各部位におけるある薬の濃度を表わし，r は外部から一定時間一定の割合で投与される薬の量を表わし，ここでは

$$
r = \begin{cases} 1000, & 0 < t < 1, \\ 250, & 12 < t < 13, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}
\tag{5.2}
$$

で与えられるものとする．また，$t=6$ 及び $t=12$ において第5番目の部位には注射により瞬間的にある量の薬を注入するものとすれば，不連続境界条件

$$x_5(6^-) - x_5(6^+) + 5.0\times 10^2 = 0,$$
$$x_5(12^-) - x_5(12^+) + 2.5\times 10^2 = 0 \qquad (5.3)$$

が成り立つ．更に，ある特定の部位における薬の濃度 x_3 は測定することが可能で，これらの測定データは

$$x_3(0) = 0,$$
$$x_3(1) = 0.908640031183 \times 10^1,$$
$$x_3(7) = 0.120949332940 \times 10^2,$$
$$x_3(13) = 0.128669237147 \times 10^2, \qquad (5.4)$$
$$x_3(20) = 0.105677098845 \times 10^2$$

で与えられているものとする．従って (5.1)〜(5.4) で与えられる問題は，身体各部位の初期条件 $x_i(0)$ $(i=1,2,4,5,6)$ を知り，かつ直接測定不可能な各部位における薬の濃度の変化の様子を推定することである．

いま，摂動パラメータ $\varepsilon=10^{-7}$，刻み巾 $h=0.0125$ (1600ステップ)，収束判定値 $\eta=10^{-10}$ とする．第1表の初期推定値を用いたと

Table 1 Initial guesses

t	${}^0x_1$	${}^0x_2$	${}^0x_3$	${}^0x_4$	${}^0x_5$
0	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
1	820.0	90.0	10.0	5.0	0.0
6	300.0	440.0	10.0	20.0	500.0
7	60.0	500.0	10.0	20.0	70.0
12	320.0	650.0	10.0	25.0	250.0
13	700.0	700.0	15.0	25.0	35.0

き，(4.1)式で与えられる収束判定条件 G の変化の様子を第

Table 2 Convergence rates

iteration	G
0	$0.1226038067 \times 10^{2}$
1	$0.1201752667 \times 10^{-1}$
2	$0.6142949960 \times 10^{-3}$
3	$0.4158093366 \times 10^{-7}$
4	$0.4706539038 \times 10^{-12}$

2表に示す．この時得られた解のトラジェクトリーを第1図に，また x_5 の数値例を第3表に示す．

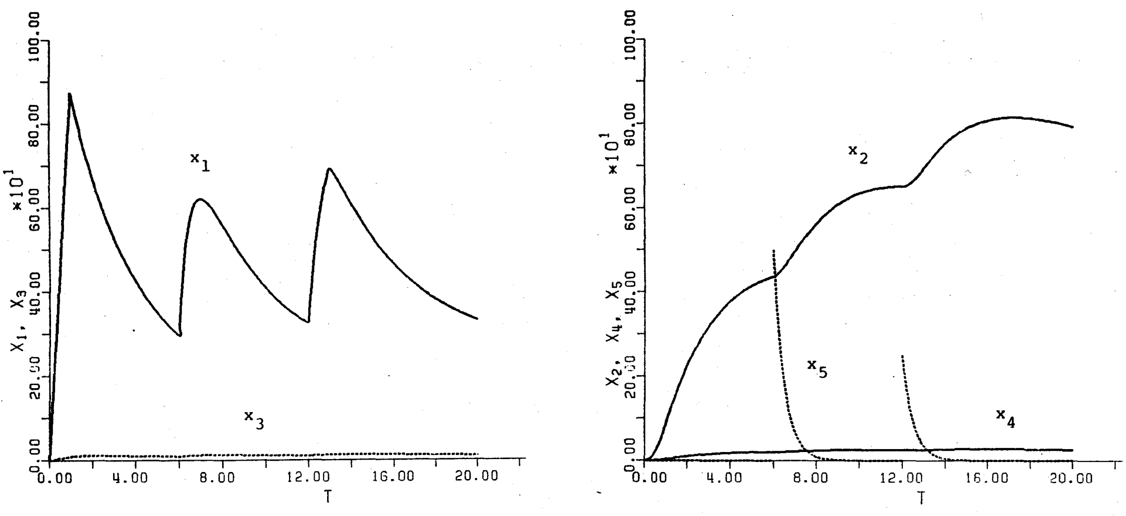

Fig. 1 Trajectories of x.

Table 3 Numerical results of x_5

t	$x_5(t^-)$	$x_5(t^+)$
0.0	$-0.2261040436\times10^{-8}$	$-0.2261040436\times10^{-8}$
1.0	$-0.3059985498\times10^{-9}$	$-0.3059985498\times10^{-9}$
6.0	$-0.1389231313\times10^{-13}$	0.5000000000×10^{3}
7.0	0.6766764207×10^{2}	0.6766764207×10^{2}
12.0	$0.3072106299\times10^{-2}$	0.2500030721×10^{3}
13.0	0.3383423680×10^{2}	0.3383423680×10^{2}
20.0	$0.2813414090\times10^{-4}$	$0.2813414090\times10^{-4}$

摂動パラメータεを変えたとき，収束に要した計算回数の一例を第4表に示す．同表から明らかなように，収束に要した計算回数は摂動パラメータεの広い範囲の値に対して一定であることがわかる．

Table 4 Effect of ε

ε	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}	10^{-11}
iteration	5	4	4	4	4	4	4	4	5	6

6. おわりに　ここでは，部分区間ごとに方程式の形或いは次元数が異なるような微分方程式において，境界条件も通常の多点境界条件の他に不連続境界条件も含むような非線形境界値問題を解くための数値解法，一般化した quasilinearization method 及び区間分割を伴う初期値修正法について述べた．

初期値修正法のアルゴリズムは，(i) quasilinearization method のように予め偏導関数 $\partial f/\partial x$ 或いは $\partial g/\partial x$ を解析的に計算しておく必要はなく，直接原方程式を与えるだけでよい，(ii) 前回の繰返し過程における関数値 $x_i^{(l)}(t)$ を記憶しておく必要はなく，各部分区間の初期値だけでよい，(iii) 従ってメモリが少なくてすみ，かつプログラムが非常に簡単になる，(iv) quasilinearization method との理論的な関係から2次収束速度が近似的に得られる，等の特徴がある．

なお，数値計算は京都大学大型計算機センター FACOM M-200 で行なった．

References

[1] R.E. Bellman and R.E. Kalaba, Quasilinearization and Nonlinear Boundary Value Problems, Elsevier, New York, 1965.

[2] T. Ojika, Initial Value Adjusting Method and the Periodic Solutions for Duffing's Equation, Memo. Osaka Kyoiku Univ., Ser. III, Vol. 26, No. 2 (1977), 111–121.

[3] T. Ojika and Y. Kasue, Initial Value Adjusting Method for the Solution of Nonlinear Multipoint Boundary Value Problems, J. Math. Anal. Appl., Vol. 69, No. 2 (1979), 359–371.

[4] T. Ojika and W. Welsh, A Numerical Method for the Solution of Multipoint Problems for Ordinary Differential Equations with Integral Constraints, J. Math. Anal. Appl., Vol. 72, No. 2 (1980).

[5] T. Ojika, On Quadratic Convergence of the Initial Value Adjusting Method for Nonlinear Multipoint Boundary Value Problems, J. Math. Anal. Appl., in print.

[6] T. Ojika and W. Welsh, A Numerical Method for Multipoint Boundary Value Problems with Application to a Three Body Problem, Inter. J. Comp. Math., Vol. 8, No. 4 (1980), in print.

[7] W. Welsh and T. Ojika, Multipoint Boundary Value Problems with Discontinuities, I: Algorithms and Applications, J. Comp. Appl. Math., in print.

[8] W. Welsh and T. Ojika, Multipoint Boundary Value Problems with Discontinuities, II: Convergence of the Initial Value Adjusting Method, J. Comp. Appl. Math. in print.

[9] T. Mitsui, On the Convergence of the Initial Value Adjusting Method for Nonlinear Boundary Value Problems, Publ. Res. Inst. Math. Sci., Kyoto Univ., Kyoto, Japan, in print.

[10] A. Schumitzky and D. Z. D'Argenio, A Program Package for Simulation and Parameter Estimation in Pharmacokinetics Systems, Comp. Prog. Biomed., to appear.